

как с низкомолекулярными биологически активными веществами, так и с катионами металлов.

Данные системы исследовались методом pH-метрического титрования в середе фонового электролита (0,15M NaCl) и температуре 37°C с последующей обработкой результатов методом математического моделирования химических равновесий (NewDALSFEK, KCM Soft, 2000). Исходя из того, что высокомолекулярный гепарин образует монолигандные комплексы и то, что мономерное звено гепарина имеет дентантность равную четырем, а так же учитывая ряд факторов (конформация цепи, стерические факторы) можно ожидать образования смешаннолигандных металлокомплексов. Ниже приводятся величины десятичных логарифмов констант образования смешаннолигандных комплексов с участием ионов металлов, высокомолекулярного гепарина(Hep), а также глицина(Gly), аргинина(Arg) (см. таблицу).

Форма	lg $\beta$
MnNHepGly <sup>3-</sup>	15,03
MnNHepArg <sup>3-</sup>	16,11

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ В ЦИСТЕИН-СЕРЕБРЯНОМ РАСТВОРЕ

*Малышев М.Д.<sup>(1)</sup>, Комаров П.В.<sup>(1,2)</sup>, Бабуркин П.О.<sup>(1)</sup>, Хижняк С.Д.<sup>(1)</sup>,  
Пахомов П.М.<sup>(1)</sup>*

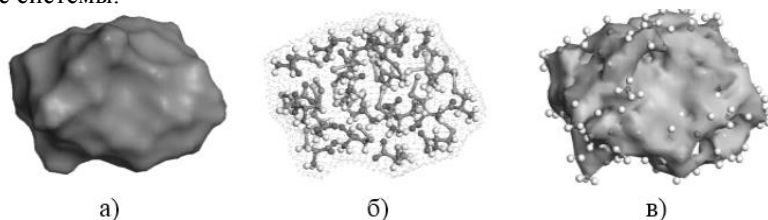
<sup>(1)</sup> Тверской государственный университет  
170100, г. Тверь, ул. Желябова, д. 33

<sup>(2)</sup> Институт элементоорганических соединений РАН  
119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 28

Изучение гелей и гелеобразного состояния вызывает большой интерес, который объясняется их широким распространением в повседневной практике и использованием в технологических процессах. Одной из систем, способных к образованию геля после введения соли инициатора при достаточно малом содержании реагентов, является водный раствор цистеина и нитрата серебра (ЦСР).

В докладе обсуждается построение мезоскопической модели ЦСР с целью изучения формирования волокон гель-сетки. Для ее реализации мы используем метод диссипативной динамики частиц (ДДЧ). В основе модели заложен экспериментально установленный факт, что на этапе созревания ЦСР в нем формируются кластеры и более крупные агрегаты из молекул меркаптида серебра (МС). Для корректного построения мо-

дели созревшего ЦСР мы изучили морфологию кластеров МС в рамках методов молекулярной механики и квантовой химии. Посредством пошагового построения кластеров из 2-22 молекул МС (см. рисунок) нами установлено, что построенные агрегаты стабилизируются в результате формирования тиол-серебряных олигомерных цепочек, а также перекрестным связыванием amino- и карбоксильных групп МС. Оценка числа свободных функциональных групп на поверхности кластеров показывает, что агрегаты МС могут выступать в роли супрамономеров при формировании волокон гель-сетки. Изучение взаимодействия функциональных групп цистеина с ионом металла (как модели введения соли инициатора) позволило установить, что ион металла может одновременно координировать как отдельные, так и все функциональные группы МС. Это может приводить к снижению водорастворимости кластеров и тем самым провоцировать их самосборку в волокна гель-сетки. Этот факт в модели ЦСР учитывался введением дифференциации взаимодействия молекул МС (координированных и некоординированных ионом металла) с растворителем. Построенная модель использовалась для изучения влияния концентрации МС и соли инициатора на фазовое состояние системы.



Кластер МС из 22 молекул: а) поверхность доступная растворителю; б) внутренняя структура кластера; в) функциональные группы на поверхности кластера

*Работа выполнена в рамках НИР по заданию Министерства образования и науки РФ на 2017–2019 (№ 4.2246.217/ПЧ). Авторы выражают благодарность МСЦ РАН за предоставление вычислительных ресурсов кластера MBC-100k.*